

Condensação de Bose-Einstein

"O condensado de Bose-Einstein é um estado da matéria

que é tipicamente formado quando um gás de bósons a baixa densidade é resfriado a temperaturas muito próximas do zero absoluto (porções de $\mu K \sim 10^{-6} K$).

Nestas condições, uma grande fração dos bósons ocupam o estado quântico de mais baixa energia; neste ponto fenômenos quânticos microscópicos, particularmente interferência entre os pacotes de ondas, se tornam aparentes macroscopicamente."

by Wikipedia

→ <https://en.wikipedia.org/wiki/Bose-Einstein condensate>

"Em 1924 o físico Satyendra Nath Bose enviou para Einstein um paper no qual ele derivava a lei de Planck para a radiação de um corpo negro tratando os fótons como um gás de partículas idênticas. Einstein generalizou ①

zou a teoria de Bose para um gás
ideal de átomos ou moléculas e distíngue
para o qual o número de partículas é
conservado, e no mesmo ano, fez a
predição que a suficientemente baixas
temperaturas as partículas ficariam
confinadas juntas no estado quântico
de mais baixa energia do sistema. Agora
sabemos que este fenômeno, chamado
condensação de Bose-Einstein, apenas acontece
para "bosons" - partículas com spin total
que é um múltiplo inteiro de $\hbar$.

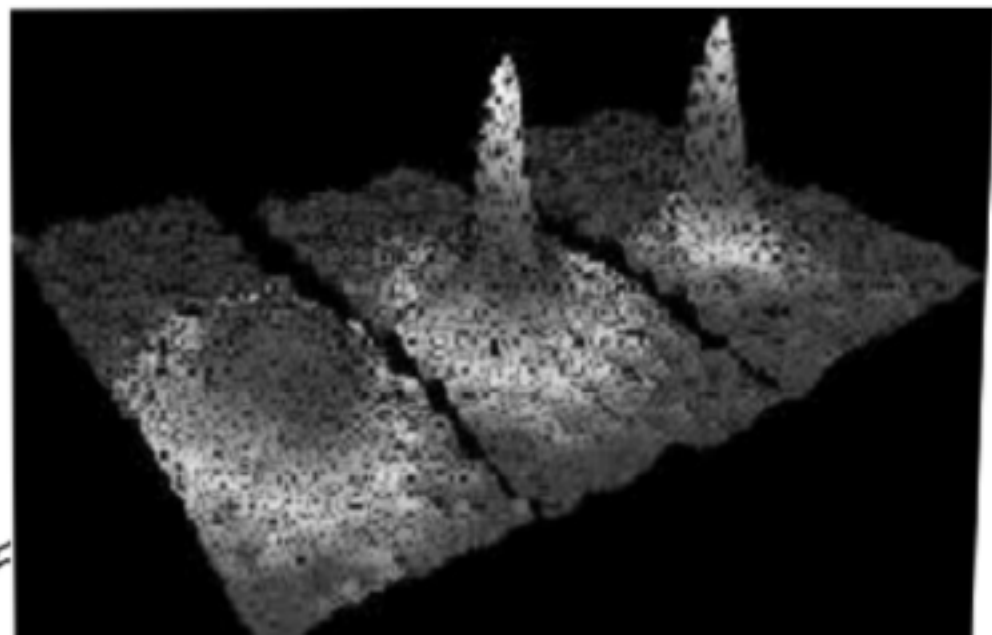
Physicists: Christopher Townsend,
Wolfgang Ketterle e Sandro Stringari. "Bose-
Einstein Condensation". Ultra cold Matter
01/03/1997

"A condensação de Bose-Einstein foi observada
em 1995 em uma série marcante de experimen-
tos com vapor de rubídio (Anderson
et al., 1995) e sódio (Davis et al., 1995)
no qual os átomos foram confinados em
armadilhas magnéticas e resfriados
a temperaturas extremamente baixas ($\sim \mu K$).

Condensação de Bose-Einstein

A primeira evidência da condensação surgiu dos medidos do tempo de λ . Os átomos eram direcionados expandir desligando a armadilha de confinamento e então fotografados utilizando métodos ópticos. Um pico marcante na distribuição de velocidade era então observado abaixo da temperatura crítica, proporcionando uma assinatura clara para a condensação de Bose-Einstein (BEC).

→ F. Dalfovo et al. "Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases" Rev. Mod. Phys. 43, 463.



I. Gás ideal de Bose em uma armadilha harmônica

A. Condensado de Bosons não interagentes:

As armadilhas magnéticas utilizadas para confinar átomos alcalinos (^7Li , ^{87}Rb , ^{23}Na) podem ser aproximadas por potenciais harmônicos

$$V_{\text{ext}}(\vec{r}) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (1)$$

Podemos então iniciar tratando o sistema como um conjunto de partículas pontuais e não interagentes confinadas pelo potencial $V_{\text{ext}}(\vec{r})$ dentro do formalismo de Mecânica quântica não relativística. A hamiltoniana será então a de um oscilador harmônico 3D

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m_p} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m_p} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m_p} + \hat{V}_{\text{ext}}(\hat{\vec{r}}) \quad (2)$$

Condensado de Bose - Einstein

Logo o conjunto de autovalores é dado por

$$E_{m_x m_y m_z} = (m_x + \frac{1}{2}) \hbar \omega_x + (m_y + \frac{1}{2}) \hbar \omega_y + (m_z + \frac{1}{2}) \hbar \omega_z \quad (3)$$

$$m_x, m_y, m_z \in \mathbb{Z}^+$$

é o "ground-state" para um conjunto de N partículas ($m_x = 0, m_y = 0, m_z = 0$) será

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \phi_0(\vec{r}_i) /$$

$$\phi_0(\vec{r}) = \left(\frac{m \omega_0}{\pi \hbar} \right)^{3/4} e^{-\frac{m}{2\hbar} (\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2)} \quad (4)$$

$$\omega_0 = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3} \quad (5)$$

A densidade de partículas em um ponto $\vec{r}$ do espaço assumirá a forma

$$n(\vec{r}) = N |\phi_0(\vec{r})|^2 \text{ que varia com } N.$$

Quantidade da número por uma vez

está independente de N e está fixada pelo comprimento do oscilador harmônico que é o raio médio da gaussiana (4)

$$\rightarrow e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}, \quad \sigma = \text{desvio padrão da média}$$

$$\rightarrow e^{-\frac{m}{2\hbar}(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2)}$$

$$\sigma_x = \left(\frac{\hbar}{m\omega_x}\right)^{1/2}, \quad \sigma_y = \left(\frac{\hbar}{m\omega_y}\right)^{1/2}, \quad \sigma_z = \left(\frac{\hbar}{m\omega_z}\right)^{1/2}$$

$$\bar{\sigma} = (\sigma_x \sigma_y \sigma_z)^{1/3} = \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ho}}\right)^{1/2}$$

$$\boxed{\lambda_{ho} = \left(\frac{\hbar}{m\omega_{ho}}\right)^{1/2}} \quad (6)$$

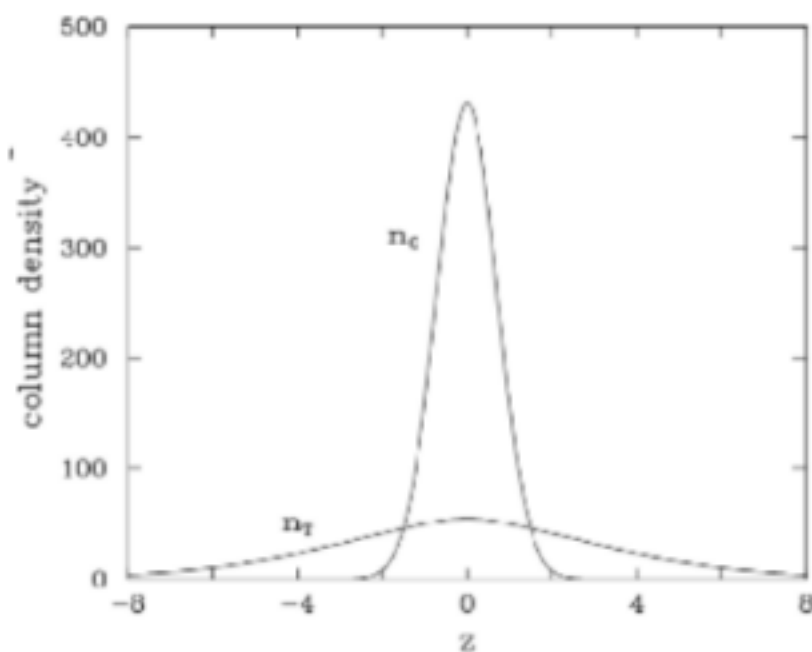
Nos experimentos $\lambda_{ho} \approx 1 \mu\text{m} (10^{-6} \text{m})$

A uma temperatura finita apenas parte dos átomos vão ocupar o estado de mais baixa energia, os outros vão estar termicamente distribuídos nos estados excitados de maior alta energia. Nesse caso, podemos tentar estimar o raio da nuvem térmica assumindo que $k_B T \gg \hbar \omega_{ho}$ e utilizando a uma distribuição clássica de Boltzmann para a densidade

Condensado de Bose - Einstein

$$n_c(\vec{r}) \propto e^{-\frac{m\omega_0^2 r^2}{2k_B T}} \Rightarrow R_T = \left(\frac{k_B T}{m\omega_0^2} \right)^{1/2}$$

$$= a_{ho} \left(\frac{k_B T}{\hbar \omega_0} \right)^{1/2} > a_{ho}$$



No espaço de momentos, aplicando a transformada de Fourier na equação (4)

$$\phi_0(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \phi_0 \rangle = \int d^3r \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \phi_0 \rangle$$

$$\Rightarrow \phi_0(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-\frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar}} \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{3/4}$$

$$e^{-\frac{m}{2\hbar}(\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2)}$$

$$\Rightarrow \phi_0(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left(\frac{m\omega_0}{\hbar} \right)^{3/4}$$

$$\left(\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{m\omega_x}{2\hbar}x^2 - i\frac{p_x}{\hbar}x} \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-\frac{m\omega_y}{2\hbar}y^2 - i\frac{p_y}{\hbar}y} \right) \\ \left(\int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-\frac{m\omega_z}{2\hbar}z^2 - i\frac{p_z}{\hbar}z} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{m\omega_x}{2\hbar}x^2 + i\frac{p_x}{\hbar}x = \frac{m\omega_x}{2\hbar} \left(x^2 + i\frac{2p_x x}{m\omega_x} \right) =$$

$$= \frac{m\omega_x}{2\hbar} \left(x + i\frac{p_x}{m\omega_x} \right)^2 + \frac{m\omega_x}{2\hbar} \frac{p_x^2}{m^2\omega_x^2} =$$

$$= \frac{m\omega_x}{2\hbar} \left(x + i\frac{p_x}{m\omega_x} \right)^2 + \frac{p_x^2}{2\hbar m\omega_x}$$

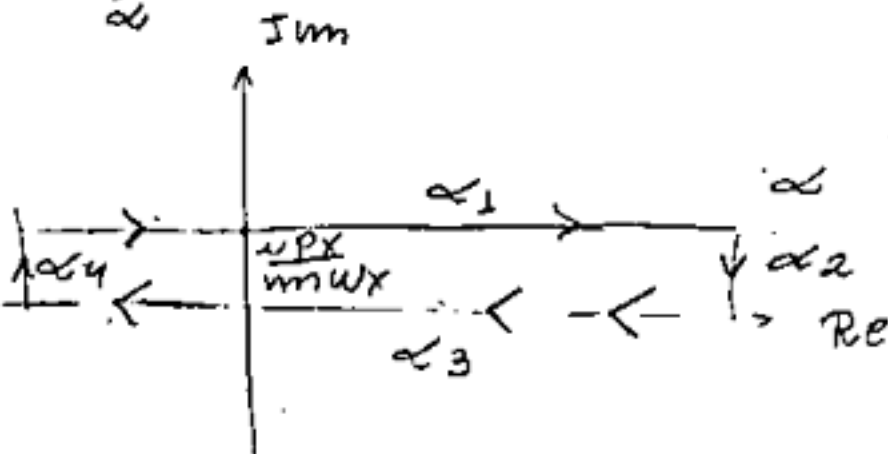
$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{m\omega_x}{2\hbar}x^2 - i\frac{p_x}{\hbar}x} = I_x =$$

$$= e^{-\frac{p_x^2}{2\hbar m\omega_x}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{m\omega_x}{2\hbar} \left(x + i\frac{p_x}{m\omega_x} \right)^2}$$

Condensado de Bose-Einstein

$$\rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{m\omega x}{2\hbar}} \left(x + i \frac{p x}{m\omega x}\right)^2 :$$

$$\int_{\infty} dz e^{-\frac{m\omega x}{2\hbar} z^2}$$



$$\int_{\alpha} = \int_{\alpha_1} + \int_{\alpha_2} + \int_{\alpha_3} + \int_{\alpha_4} = 0$$

pelo teorema de Cauchy

$$\Rightarrow \int_{\alpha_1} = - \int_{\alpha_3}$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{m\omega x}{2\hbar}} \left(x + i \frac{p x}{m\omega x}\right)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' e^{-\frac{m\omega x}{2\hbar} x'^2} =$$

$$= 2 \int_0^{\infty} dx' e^{-\frac{m\omega x}{2\hbar}} x'^2 = \sqrt{\frac{2\hbar\pi}{m\omega x}}$$

$$\Rightarrow J_x = \left(\frac{2\hbar\pi}{m\omega x}\right)^{1/2} e^{-\frac{p_x^2}{2\hbar m\omega x}}$$

$$\Rightarrow \phi_0(\vec{p}) = \frac{1}{m^{3/2}} \frac{1}{\omega \hbar^{3/2}} \left(\frac{m\omega \hbar}{\pi}\right)^{3/4}$$

$$e^{-\frac{p_x^2}{2\hbar m\omega x} - \frac{p_y^2}{2\hbar m\omega y} - \frac{p_z^2}{2\hbar m\omega z}}$$

$$\Rightarrow \phi_0(\vec{p}) = \left(\frac{1}{m\omega \hbar \pi}\right)^{3/4} e^{-\frac{p_x^2}{2\hbar m\omega x} - \frac{p_y^2}{2\hbar m\omega y} - \frac{p_z^2}{2\hbar m\omega z}}$$

$$\Rightarrow |\phi_0(\vec{k})| = \left(\frac{1}{m\omega \hbar \pi}\right)^{3/4} e^{-\frac{\hbar k_x^2}{2m\omega x} - \frac{\hbar k_y^2}{2m\omega y} - \frac{\hbar k_z^2}{2m\omega z}}$$

(6)

$$|\vec{\sigma}'| = \left(\frac{m\omega \hbar}{\pi}\right)^{1/2} = \alpha \hbar^{-1} \quad (7)$$

De forma análoga a distribuição clássica para a densidade no espaço de posições podemos definir a dependência da densidade com $\vec{k}$ no espaço recíproco

Condensado de Bose-Einstein

$$n(\vec{k}) \propto e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m k_B T}}$$

$$R_T = \left(\frac{m k_B T}{\hbar^2} \right)^{1/2} \frac{W_{h_0}^{1/2}}{W_{h_0}^{1/2}} =$$

$$= a_{h_0}^{-1} \left(\frac{k_B T}{\hbar^2 W_{h_0}} \right)^{1/2} > a_{h_0}^{-1}, \quad \underline{k_B T \gg \hbar W_{h_0}}$$

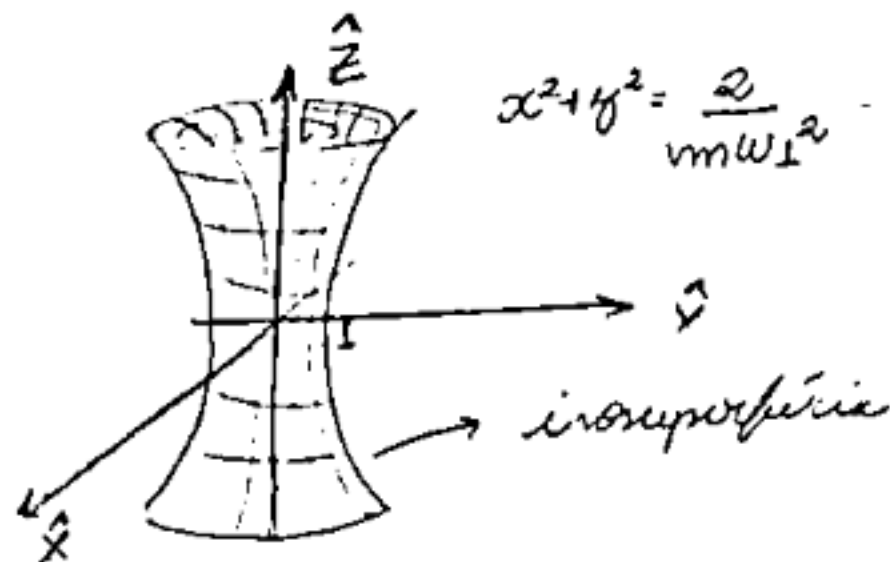
O condensado é identificado experimentalmente como um pico acentuado na distribuição espacial e de momento. No primeiro caso o condensado é deixado expandir livremente, desligando a armadilha, e a densidade da nuvem é medida com absorção de luz (Anderson et al., 1995). No caso de partículas não interagentes a expansão é balística e a distribuição da nuvem em expansão pode ser diretamente relacionada a distribuição de momentos inicial. No segundo caso, a densidade de átomos na armadilha é medida diretamente utilizando espalhamento dispersivo de luz (Andrews et al., 1996).

A forma dos campos de confinamento também fixam a simetria do problema.

Os primeiros experimentos com rubídeos e sódio foram feitos utilizando armadilha axial. Neste caso,

$$\omega_{\perp} = \omega_x = \omega_y$$

$$V_{\text{ext}}(\vec{r}) = \frac{m}{2} [\omega_{\perp}^2 (x^2 + y^2) + \omega_z^2 z^2]$$



$h \equiv$ armadilha da armadilha

$$h = \omega_z / \omega_{\perp}$$

Dessa forma a eq. (4) é reescrita como

$$\psi_0(\vec{r}) = \frac{h^{1/4}}{\pi^{3/4} a_{\perp}^{3/2}} e^{-\frac{1}{2a_{\perp}^2} (r_{\perp}^2 + h z^2)} \quad (8)$$

$$a_{\perp} = \left(\frac{\hbar}{m\omega_{\perp}} \right)^{1/2}, \quad \omega_{\perp} = h^{-1/3} \omega_{h_0}, \quad a_{\perp} = h^{1/6} a_{h_0} \quad (12)$$

Condensado de Bose-Einstein

A medida de uma armadilha com simetria axial pode proporcionar mais evidências da condensação de Bose-Einstein.

Resolvendo a equação (6)

$$\psi_0(\vec{p}) = A e^{-a_1^2 (p_1^2 + \hbar^{-1} p_z^2) / 2\hbar^2}$$

$$\rightarrow \langle p_z^2 \rangle = |A|^2 \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a_1^2 \frac{p_x^2}{\hbar^2}} \frac{p_x^2}{\hbar^2} d p_x \right\}^2$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d p_z p_z^2 e^{-a_1^2 \frac{p_z^2}{\hbar^2}}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow L &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-a x^2} = -\frac{\partial}{\partial a} \left(\sqrt{\frac{\pi}{a}} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \frac{\pi^{1/2}}{a^{3/2}} \end{aligned}$$

$$\rightarrow \langle p_z^2 \rangle = |A|^2 \frac{1}{2} \pi^{1/2} \frac{\hbar^3}{a_1^3}$$

$$\Rightarrow \langle p_1^2 \rangle = |A|^2 \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z e^{-\frac{a_1^2 \hbar^{-1} p_z^2}{\hbar^2}} \right\} \xi \hbar^{1/2}$$

$$\int d^2 p_1 p_1^2 e^{-\frac{a_1^2 p_1^2}{\hbar^2}}$$

↳ Sou utilizar a simetria axial e tomar:
 $p_1^2 = p_x^2$

$$\Rightarrow \langle p_1^2 \rangle = |A|^2 \frac{\xi^2 \hbar^{1/2} \pi^{1/2}}{2} \frac{\hbar^3}{a_1^3}$$

$$\Rightarrow \frac{\langle p_z^2 \rangle}{\langle p_1^2 \rangle} = \sqrt{\hbar} \quad (9)$$

$$\hookrightarrow \frac{\Delta p_z}{\Delta p_1} = \sqrt{\hbar}$$

Então o formato da nuvem bôsonica em expansão será o de uma ellipse de "aspect ratio" $\sqrt{\hbar}$. De as partículas, não estarem no estado de condensado (mas baixa energia) seu momento será continuamente distribuído, ou seja, sua distribuição será isotrópica no espaço de momentos e $\hbar$ será igual 1.

Condensação de Bose-Einstein

De fato, a ocorrência de anisotropia no pico do condensado desde o início foi interpretada como uma importante assinatura de BEC (Anderson et al., 1995; Davis et al., 1995; Mies et al., 1996a). O primeiro valor medido para o "aspect ratio" foi cerca de 50% maior que o previsto $\sqrt{h}$ do modelo não interagente (Anderson et al., 1995). Uma comparação quantitativa seria obtida incluindo a interação entre os átomos (Holland and Cooper, 1996; Dalfovo and Stringari, 1996; Holland et al., 1997; Dalfovo et al., 1997c). Contudo, o modelo não interagente ainda aporta um efeito interessante devido a anisotropia.

B. Bosons confinados a temperatura finita: limite termodinâmico

No ensemble grand-canônico, o número total de bosons em um dado estado, bem como, a energia total do sistema são dados a uma temperatura T por

$$N = \sum_{m_1, m_2, m_3} \left\{ e^{\beta(\epsilon_{m_1, m_2, m_3} - \mu)} - 1 \right\}^{-1} \quad (10)$$

$$E = \sum_{m_x, m_y, m_z} \epsilon_{m_x m_y m_z} \left\{ \frac{e^{\beta(\epsilon_{m_x m_y m_z} - \mu)}}{e^{\beta(\epsilon_{m_x m_y m_z} - \mu)} - 1} \right\}^{-1} \quad (11)$$

Logo,

$$\langle N_{m_x, m_y, m_z} \rangle = \left\{ \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{m_x m_y m_z} - \mu)} - 1} \right\} \quad (12)$$

distribuição de Bose-Einstein (Apêndice A)

μ : potencial químico, $\beta = 1/k_B T$

É conveniente separar a ocupação do "ground state" do número total de partículas N e chamar a ocupação nesse estado de

N_0

$$\epsilon_{000} = \frac{\hbar}{2} (\omega_x + \omega_y + \omega_z) = \frac{3\hbar}{2} \bar{\omega}$$

$$\bar{\omega} = \frac{\omega_x + \omega_y + \omega_z}{3}$$

Como queremos que a ocupação do "ground-state" se torne macroscópica abaixo de uma determinada temperatura crítica de condensação $T < T_c$, nesse regime

Condensação de Bose-Einstein

$$\mu \rightarrow \mu_c = \frac{3}{2} kT \quad (13)$$

Logo, substituindo (13) em (10) e assumindo N_0

$$N - N_0 = \sum_{m_x, m_y, m_z \neq 0} \frac{1}{e^{\beta k(\omega_x m_x + \omega_y m_y + \omega_z m_z)} - 1} \quad (14)$$

Quando $N \rightarrow \infty$ podemos escrever

$$N - N_0 = \int_0^\infty \frac{d m_x d m_y d m_z}{e^{\beta k(\omega_x m_x + \omega_y m_y + \omega_z m_z)} - 1} \quad (15)$$

que corresponde a derivada semiclássica dos estados excitados. Essa derivada é boa quando N muito grande e $kBT \gg \hbar \omega_{ho}$.

A integral (15) pode ser avaliada e encontraremos

$$N - N_0 = \zeta(3) \left(\frac{kBT}{\hbar \omega_{ho}} \right)^3 \quad (16)$$

$\zeta(m)$ é a função ζ de Riemann.

Impondo o limite $N_0 \rightarrow 0$ na transição obtemos a temperatura de transição

$$k_B T_c = k_B W_0 \left(\frac{N}{\zeta(3)} \right)^{1/3} = 0.94 k_B W_0 N^{1/3} \quad (17)$$

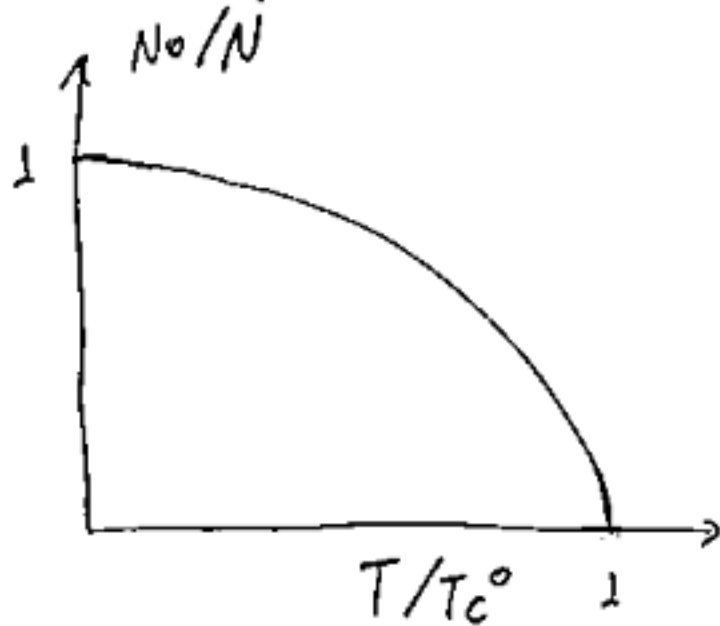
Para temperaturas acima de T_c o potencial químico se torna menor que μ_c e depende de N , enquanto a população do estado de mais baixa energia se torna da ordem de 1.

O limite termodinâmico para estes sistemas é obtido quando $N \rightarrow \infty$ e $W_0 \rightarrow 0$ mantendo $N W_0^3$ constante.

Substituindo (17) em (16) obtemos a fração do condensado ($T < T_c$):

$$\left| \frac{N_0}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right| \quad (18)$$

Condensação de Bose-Einstein



O mesmo resultado pode ser obtido reescrevendo (15) como uma integral em termos da energia, na forma

$$N - N_0 = \int_0^{\infty} \frac{\rho(\epsilon) d\epsilon}{e^{\beta\epsilon} - 1} \quad (16)$$

$\rho(\epsilon) = (V/2\pi^2) (\hbar\omega_0)^{-3} \epsilon^2$ é a densidade de estados

$$E = \int_0^{\infty} \frac{d\epsilon \rho(\epsilon) \epsilon}{e^{\beta\epsilon} - 1} \quad (17)$$

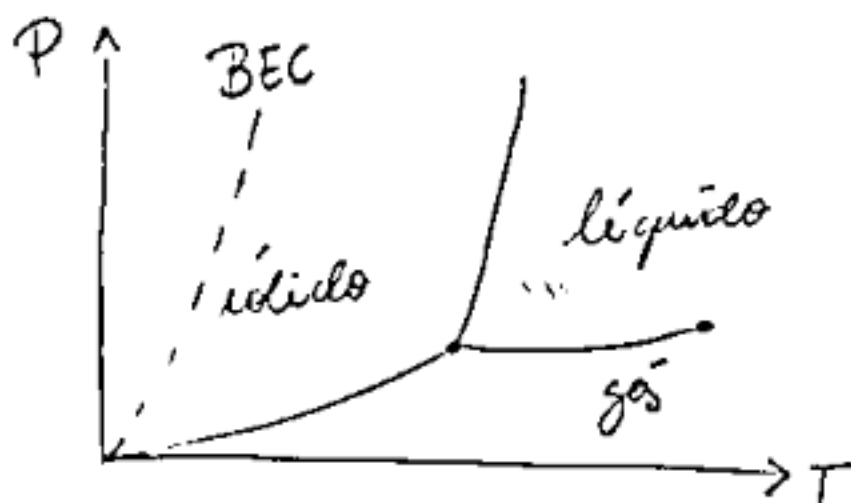
$$\frac{\bar{E}}{Nk_B T_c^0} = 3 \frac{\zeta(4)}{\zeta(3)} \left(\frac{T}{T_c^0} \right)^4 \quad (18)$$

Portanto a energia por sítio calculada a
partir das propriedades termodinâmicas

Condensação de Bose-Einstein

II. Gás de Bose Graduamente interagente

A. Gases atômicos colúmbio e condensação



Todos os sistemas atômicos interagentes, com exceção do hélio, realizam uma transição de fase para a fase sólida a temperaturas baixas e suficientes. Na figura acima está representado um diagrama de fase P-T e também está presente a linha caracterizando a transição de fase BEC do gás ideal de Bose. Acima desta linha um gás de hélio representa condensação de Bose-Einstein. No entanto, esta configuração é instável já que o equilíbrio termodinâmico, numa condição de temperatura e pressão, corresponde a fase cristalina. A baixas temperaturas o mecanismo

de decaimento do condensado é dominado pela recombinação de três-corpos que não é favorável para a formação de moléculas, levando o sistema ao estado sólido termodinamicamente estável.

A BEC pode no entanto ser garantida em condições de instabilidade se alguns importantes critérios forem satisfeitos:

- * $n = \frac{N}{V}$ baixa de forma que a colisão de 3 corpos não ocorra ($\sim 10^{13} - 10^{15}$ átomos/cm³);

- * gás deve estar longe de paredes, onde a interação favoreceria o surgimento de moléculas;

- * Efeitos de recombinação não são extinguidos se as amostras forem spin-polarizadas.

As condições acima não alcançadas se confinarmos um gás muito espesso / frio e spin-polarizado em uma armadilha magnética.

De fato, as interações relevantes nessa situação serão as colisões entre duas partículas. Em gases frios e diluídos, as colisões serão propriamente consideradas no comprimento de

Condensação de Bose-Einstein

espalhamento de ondas-s que representa
o parâmetro chave de interação nesses
sistemas

B. Colisões a baixa energia e comprimento de espalhamento

Desconsiderando pequenas interações relati-
vísticas spin-spin e spin-órbita, a
amplitude de espalhamento da colisão
entre dois átomos se reduz a solução
da eq. de Schrödinger para o movimento
relativo

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(r) - E \right) \psi(\vec{r}) = 0 \quad (11)$$

$\rightarrow E > 0$: estado de partícula livre.

$\rightarrow \vec{p} = \vec{p}_1 - \vec{p}_2$.

$\rightarrow m^* = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$

Queremos uma solução dessa equação
no regime assintótico $r \gg r_0$, r_0' e
alome do potencial $V(r)$. Nesse regime,
considerando também a simetria do
potencial, a solução será dada por

$$\Rightarrow \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (2.0)$$

" θ " o ângulo entre $\hat{r}$ e $\hat{z}$

No caso de um sistema bôsonico comple-
tamente polarizado, o auto estado compo-
sital será uma função par então a
seção de choque diferencial assumirá
a forma

$$\left| \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 \right| \quad (2.1)$$

e a parte espacial da função de onda
ilustrará ser par

condenação de Born-Einstein

Após de calcular a amplitude de espalhamento é conveniente expandir $\psi(\vec{r})$ em ondas parciais

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} R_{k,l}(r) i^l (2l+1) P_l(\cos\theta) \quad (22)$$

Onde $R_{k,l}(r)$ é solução da parte radial da eq. 19.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^* r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m^* r^2} + (V(r) - E(k)) \right] R_{k,l}(r) = 0 \quad (23)$$

No limite $r \gg r_0$ o potencial pode ser desprezado assim como o termo centrífugo, sendo a solução dada por

$$R_{k,l}(r \gg r_0) = \frac{e^{i\delta_l}}{kr} \sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l) \quad (24)$$

$\delta_l(k)$ sendo o "phase Shift"

Também podemos fazer a expansão em ondas parciais da função $e^{i k z}$

$$e^{i k z} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos \theta) \quad (25)$$

No limite assintótico $r \rightarrow \infty$

$$j_l(kr) \underset{r \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{2i kr} \left(e^{i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) \quad (26)$$

Logo, no regime de interesse $r \gg r_0$

$$e^{i k z} \underset{r \gg r_0}{=} \frac{1}{2i kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \left(e^{i kr - i(kr - \frac{l\pi}{2})} - e^{-i kr + i(kr - \frac{l\pi}{2})} \right) \quad (27)$$

Utilizando as expansões para calcular $\psi(\vec{r}) = e^{i k z}$ e fatorando $r e^{-i k r}$,
direto obter

$$g_k(\theta) = \frac{1}{2i k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i l \frac{\pi}{2}} - 1) \quad (28)$$

Indenmação de Bore - Einstein

No caso em que estamos tratando apenas os valores de l par não contribuem para $f_K(0)$.

Para calcular o "phase Shift" δ_l é conveniente reduzir a eq. de Schrödinger. A redução é simples no regime de baixas energias.

$$k r_0 \ll 1 \quad (29)$$

Então para distâncias $r \ll 1/k \Rightarrow$

$\Rightarrow k \ll 1/r$ e podemos tomar $E = 0$

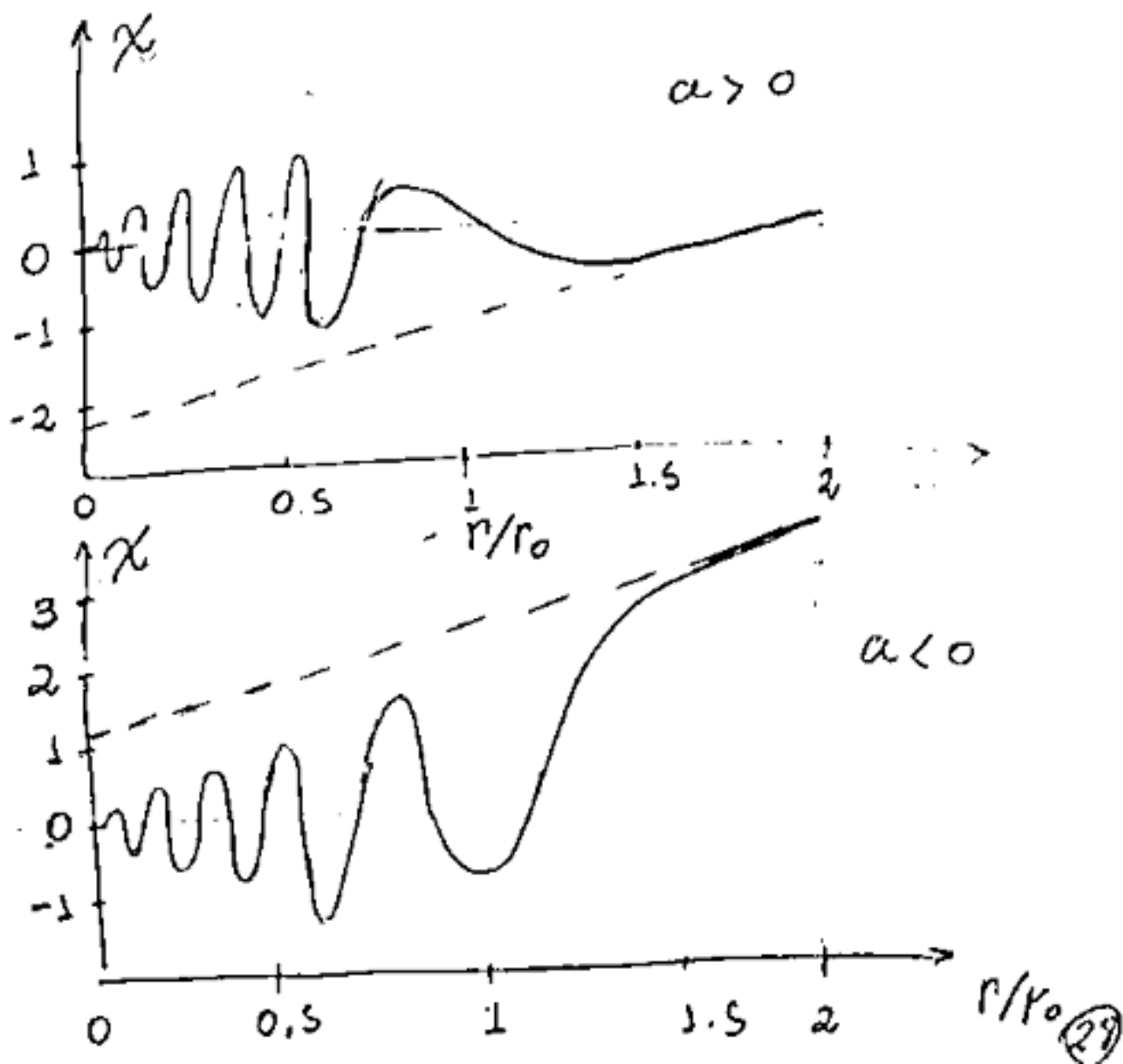
na eq. 23. Vamos discutir o caso mais importante $l=0$, onde a eq. reduzida se torna a forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + V(r) \right] R_{K,0}(r) = 0 \quad (30)$$

$$R_{K,l}(r) = \frac{\chi_{K,l}(r)}{kr}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 \chi_{k,0}(r)}{\partial r^2} - \frac{2m^* V(r)}{\hbar^2} \chi_{k,0}(r) = 0 \quad (3)$$

O comportamento de $\chi_{k,0}(r)$ vai depender da escolha do potencial, mas no geral ele terá o seguinte comportamento a depender do comprimento de espalhamento "a"



Condição de Born - Einstein

A solução da eq 31 deve corresponder com a forma assintótica 2^4 na região

$$r_0 \ll r \ll 1/k \quad (32)$$

Na região $r \gg r_0$ o termo de interação na eq. 31 pode ser ignorado e a solução terá a forma linear

$$\chi_{k0} = C_0(1 - Kr) \quad (33)$$

O valor de K vai depender da escolha de $V(r)$. Por outro lado se $Kr \ll 1$

$$\sin(kr + \delta_0) \sim -kr \cos \delta_0 + \sin \delta_0$$

$$\Rightarrow \chi_{k0} = e^{i\delta_0}(kr \cos \delta_0 + \sin \delta_0)$$

$$= e^{i\delta_0} \sin \delta_0 (kr \cot \delta_0 + 1)$$

$$\Rightarrow C_0 = e^{i\delta_0} \sin \delta_0, \quad K = -k \cot \delta_0 \quad (34)$$

Quando $k \ll 1$ eq. resulta em

$$-\frac{k_v}{k} = \text{algo} = \frac{1}{\text{algo}} \rightarrow \infty \rightarrow$$

$$\rightarrow \text{algo} \sim 0 \rightarrow \text{algo} \sim \delta_0$$

$$\Rightarrow \boxed{\delta_0 \sim -\frac{k_v}{k}} \quad (35)$$

Uma investigação similar mostra que $S_L \propto k^2 l$ para valores maiores de l . Logo, no regime $k \rightarrow 0$ apenas o termo $l=0$ sobrevive

Lembrando que o comprimento de espalhamento de ondas é definido por

$$\boxed{g(\theta)_{k \rightarrow 0} = -a} \quad (36)$$

$$\Rightarrow \boxed{a = -\frac{\delta_0}{k} = \frac{1}{k}} \quad (37)$$

Condensação de Bose - Einstein

B. Primeira ordem de aproximação:

Estado fundamental e equação de estado

Como já discutido anteriormente, em gases rarefeitos em intervalos das forças interatômicas τ_0 é muito menor que a distância média entre as partículas

$d = n^{-1/3}$, fixado pela densidade $n = \frac{N}{V}$ do gás. Então é possível considerar configurações envolvendo pares de partículas interagentes, enquanto configurações com três ou mais partículas interagindo simultaneamente podem ser negligenciadas. Além disso, a distância entre as partículas é sempre grande o suficiente para usar o limite assintótico para a função de onda do movimento relativo entre as partículas, que por sua vez é fixada pela amplitude de espalhamento. Isto implica que todas as propriedades do sistema podem ser expressas em termos dessa quantidade e

não é muiçuco mas de valores da
interação entre dois corpos. Além disso,
estamos considerando gases abaixo da
temperatura crítica para BEC, logo,

$$\left| \frac{\mu_B}{\hbar} \right| \ll 1 \quad (38)$$

Para uns valores de momento a amplitude
de espalhamento será dada pelo comprimento
de espalhamento de onda S "a", logo um
parâmetro caracteriza todos os efeitos de
interação nas propriedades físicas do gás.
Em particular a condição muiçuca
de diluição pode ser escrita como

$$|a| \ll n^{-1/3} \quad (39)$$

que é similar a requerir que o parâmetro
do gás $n|a|^3$ seja muito pequeno e deve
ser sempre satisfeita para se aplicar a
teoria de gases diluídos.

Condensação de Bose-Einstein

Vamos escrever o hamiltoniano do sistema em termos dos operadores de campo $\hat{\psi}$

$$\hat{H} = \int \frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \hat{\psi}^\dagger \vec{\nabla} \hat{\psi} d^3r + \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^\dagger \hat{\psi}^\dagger V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{\psi} \hat{\psi} d^3r_1 d^3r_2 \quad (40)$$

$V(\vec{r})$ o potencial de interação entre dois corpos

Para um gs uniforme ocupando um volume V o operador de campo pode ser escrito como

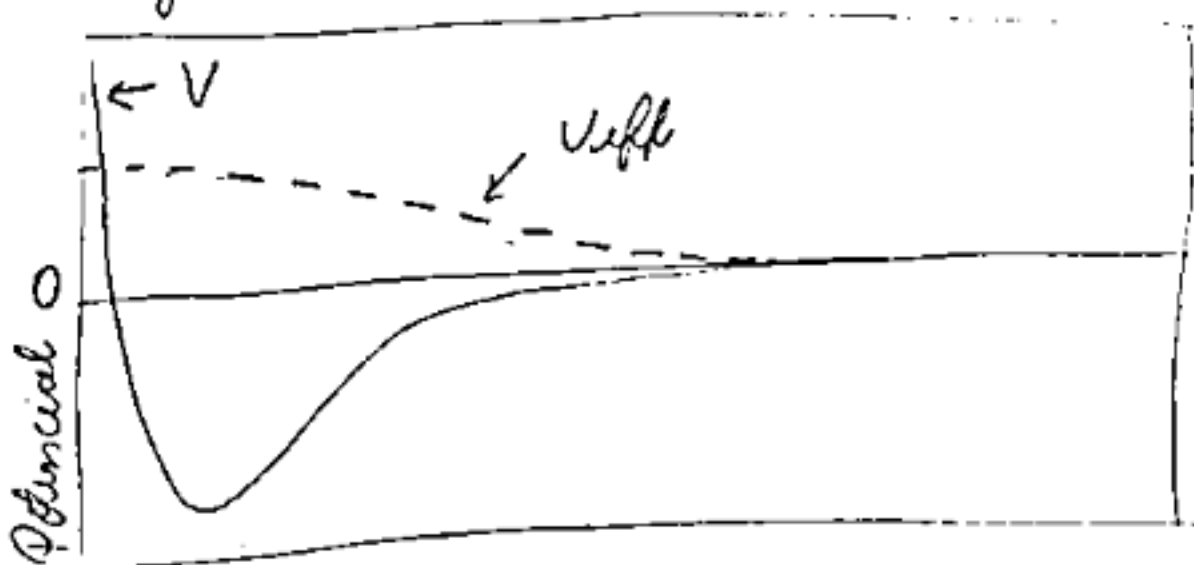
$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{p}} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{p} \cdot \frac{\vec{r}}{\hbar}} \quad (41)$$

Substituindo

$$\hat{H} = \sum_{\vec{p}} \frac{p^2}{2m} \hat{a}_{\vec{p}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} \hat{a}_{\vec{p}+\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}-\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{p}} \hat{a}_{\vec{q}} \quad (42)$$

$$V_{\vec{q}} = \int V(\vec{r}) e^{-i\vec{q} \cdot \frac{\vec{r}}{\hbar}} d^3r$$

A curto distâncias o potencial $V(\vec{r})$
 vai em geral divergir, ou seja, vai levar
 a valores de V divergentes, nesse caso,
 a contribuição do potencial não poderá
 ser tratada de forma perturbativa. No
 entanto, no regime de gases de íons que
 estamos discutindo a forma do potencial
 não será importante para descrever as
 propriedades macroscópicas do gás. Então
 devemos aproximar o potencial $V(\vec{r})$, por
 um potencial $V_{\text{eff}}(\vec{r})$ mais regular na
 origem.



Condensação de Bose-Einstein

Já que apenas pequenos valores de momento estão envolvidos: no próximo passo iremos considerar apenas valores de $q=0$ para transformada de Fourier de V_{eff} :

$$V_0 = \int V_{eff}(\mathbf{r}) d^3r \quad (43)$$

Logo,

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \hat{a}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{p}} + \frac{V_0}{2V} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4} \hat{a}_{\mathbf{p}_1+\mathbf{p}_2}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{p}_3+\mathbf{p}_4}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{p}_1} \hat{a}_{\mathbf{p}_2} \quad (44)$$

Agora devemos fazer a aproximação de Bogoliubov para trocar $\hat{a}_0$ com um número C :

$$\hat{a}_0 \approx \sqrt{N_0} \quad (45)$$

Essa aproximação não pode ser feita para um potencial realístico, já que, para distâncias da ordem de λ_0 o potencial é forte e as correlações são importantes

Como estamos interessados em temperaturas
abaixo de T_c^0 a ocupação de estados
com $p \neq 0$ será pequena e sua contribuição
para H pode ser desprezada. Por outro lado
abaixo de T_c^0 , $N_0 \sim N$. Logo,

$$E_0 = \frac{N^2 V_0}{2V} \quad (46)$$

Na mesma ordem de aproximação podemos
expressar V_0 em termos do comprimento
de espalhamento, usando o resultado

$V_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$ da aproximação de Born. Logo,
a energia do estado fundamental pode
ser escrita como

$$E_0 = \frac{1}{2} N m g \quad (47)$$

$m = \frac{N}{V}$ onde foi introduzido a constante
de acoplamento

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \quad (48)$$

Distribuição de Bose - Einstein (APENDICE A)

Seja um sistema físico com N estados possíveis de energia. Considerando além disso que se trata de um sistema Bósonico, podemos representar este sistema na base dos auto-estados de ocupação

$$\{ |n_{\vec{k}_1}, n_{\vec{k}_2}, n_{\vec{k}_3}, \dots, n_{\vec{k}_N}\rangle \}$$

$$\hat{N} = \sum_{l=1}^N n_{\vec{k}_l}; \quad \hat{H} = \sum_{l=1}^N \epsilon_{\vec{k}_l} n_{\vec{k}_l}$$

A probabilidade de ~~um~~ este sistema estar de uma energia E será dada no ensemble grand-canônico por

$$P(E) = \frac{e^{(\mu \hat{N} - E) \beta}}{Z}$$

$$Z = \sum_{\{n_{\vec{k}_1}, n_{\vec{k}_2}, \dots, n_{\vec{k}_N}\}} e^{(\mu \hat{N} - \hat{H}) \beta} = \sum_{\{n_{\vec{k}_1}, n_{\vec{k}_2}, \dots, n_{\vec{k}_N}\}} e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{k}_1}) n_{\vec{k}_1}} e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{k}_2}) n_{\vec{k}_2}} \dots e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{k}_N}) n_{\vec{k}_N}}$$

$$\Rightarrow Z = \sum_{\{\vec{m}_{\vec{k}1}, \vec{m}_{\vec{k}2}, \dots, \vec{m}_{\vec{k}N}\}} \prod_{l=1}^N e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{k}l}) m_{\vec{k}l}}$$

$$m_{\vec{k}l} =$$

$$= \prod_{l=1}^N \sum_{m_{\vec{k}l}=0}^{\infty} \underbrace{e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{k}l}) m_{\vec{k}l}}}_h$$

$$\mu < \epsilon_{\vec{k}l}$$

$$\rightarrow \Sigma(h) = \sum_{m=0}^{\infty} h^m = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{m=0}^N h^m$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} 1 + h + h^2 + \dots + h^N =$$

$$= \lim_{N \rightarrow \infty} 1 + h \underbrace{(1 + h + h^2 + \dots + h^{N-1})}_{\Sigma(h) - h^N}$$

$$\rightarrow \Sigma(h) = \lim_{N \rightarrow \infty} (1 + h \Sigma(h) - h^{N+1}) \Rightarrow$$

$$\rightarrow \Sigma(h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1 - h^{N+1}}{1 - h} \right\} \stackrel{|h| < 1}{=} \frac{1}{1 - h}$$

$$\Rightarrow Z = \prod_{l=1}^N \left\{ \frac{1}{1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{k}l})}} \right\}$$

Distribuição de Bose - Einstein

$$\rightarrow \langle \hat{n}_{\vec{k},m} \rangle = \frac{1}{\prod_{l=1, l \neq m}^N} \sum_{n_{\vec{k},l}=0}^{\infty} e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{k},l})}$$

$$n_{\vec{k},l} \left(\sum_{n_{\vec{k},m}=0}^{\infty} e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{k},m})} n_{\vec{k},m} \right) =$$

$$\frac{N}{\prod_{l=1}^N} \sum_{n_{\vec{k},l}=0}^{\infty} e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{k},l})} n_{\vec{k},l}$$

$$= \sum_{n_{\vec{k},m}=0}^{\infty} n_{\vec{k},m} \left\{ e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{k},m})} \right\}^{n_{\vec{k},m}}$$

$$\sum_{n_{\vec{k},m}=0}^{\infty} \left\{ e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{k},m})} \right\}^{n_{\vec{k},m}}$$

$$\rightarrow e^{\beta(\mu - \epsilon_{\vec{k},m})} = L < 1$$

$$\rightarrow \langle \hat{n}_{\vec{k},m} \rangle = \frac{\sum_{n_{\vec{k},m}=0}^{\infty} n_{\vec{k},m} L^{n_{\vec{k},m}}}{\sum_{n_{\vec{k},m}=0}^{\infty} L^{n_{\vec{k},m}}}$$

$$\rightarrow \langle m \vec{k}_{lm} \rangle = \frac{\hbar \frac{\partial \Sigma(\hbar)}{\partial \hbar}}{\Sigma(\hbar)} =$$

$$= \hbar \frac{\partial \ln(\Sigma(\hbar))}{\partial \hbar}$$

$$\rightarrow \langle m \vec{k}_{lm} \rangle = \hbar \frac{\partial \left(\frac{1}{1-\hbar} \right)}{\partial \hbar} \bigg/ \frac{1}{1-\hbar} =$$

$$= \hbar \frac{1}{(1-\hbar)^2} \times \frac{1}{1} = \frac{\hbar}{1-\hbar}$$

$$\rightarrow \langle m \vec{k}_{lm} \rangle = \frac{e^{\beta(\mu - \epsilon \vec{k}_{lm})}}{1 - e^{\beta(\mu - \epsilon \vec{k}_{lm})}} =$$

$$= \frac{1}{e^{\beta(\epsilon \vec{k}_{lm} - \mu)} - 1}$$

$$\rightarrow \boxed{\langle m \vec{k}_{lm} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon \vec{k}_{lm} - \mu)} - 1}}$$

Condensação de Bose-Einstein

Referências:

- F. Dalfovo et al. "Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases". Rev. Mod. Phys. 71, 463;
- L. Pitaevskii and Sandro Stringari "Bose-Einstein Condensation". 2008. Clarendon Press;
- Notas de Aula de MOTT. Profª Maria Zukanovich Funchal;
- H. Goldstein and T. M. Yan. "Quantum Mechanics: Fundamentals". 2003. Springer;